

Влияние магнитных полей более удивительно. Укажем только на работу [10], в которой также наблюдаются необычные влияния магнитных полей — образование магнитоэлектретов в ПЭ, изменение структуры и др.

### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Гуль В. Е., Царский Л. Н., Майзель Н. С., Шенфильд Л. Э., Журавлев В. С., Шибря Н. Г. Электропроводящие полимерные материалы. М.: Химия, 1968. 248 с.
- [2] Василенок Ю. И. Предупреждение статической электризации полимеров. Л.: Химия, 1981. 208 с.
- [3] Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронные свойства легированных полупроводников. М.: Наука, 1979. 416 с.
- [4] Лесото А. П., Усиченко В. М., Будницкий Ю. С., Акутин М. С., Пономаренко А. Т., Овчинников А. А. // ДАН СССР. 1984. Т. 274. № 6. С. 1410—1413.
- [5] Дорофеева Т. В., Шклярова Е. И., Галашина Н. М., Григоров Л. Н., Ениколопан Н. С. // ДАН СССР. 1984. Т. 276. № 5. С. 1155—1159.
- [6] Ландау Л., Лифшиц Е. И. Статистическая физика. М.: Наука, 1976. 584 с.
- [7] Кестельман В. Н. Физические методы модификации полимерных материалов. М.: Химия, 1980. 233 с.
- [8] Белый В. А., Снежко В. В., Батаев Ю. В., Воронежцев Ю. И., Гольдаде В. А., Пинчук Л. С. // ДАН СССР. 1986. Т. 290. № 2. С. 373—375.
- [9] Харитонов Е. В. Диэлектрические материалы с неоднородной структурой. М.: Радио и связь, 1983. 126 с.
- [10] Манько Т. А., Кваша А. Н., Соловьев А. В., Щенева В. Б., Еромолаев И. М. // Механика композиционных материалов. 1984. № 4. С. 589—590.

Ленинградский  
государственный университет  
Ленинград

Поступило в Редакцию  
29 августа 1988 г.  
В окончательной редакции  
13 января 1989 г.

УДК 539.219

Физика твердого тела, том 31, в. 8, 1989  
Solid State Physics, vol. 31, № 8, 1989

## РАСЧЕТ ТЕПЛОЕМКОСТИ И ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ КРИСТАЛЛА $ZnGeP_2$

*В. Г. Тютчев*

Полупроводниковое соединение  $ZnGeP_2$  является перспективным соединением для нелинейной оптики в инфракрасном диапазоне. ИК оптические свойства определяются структурой колебательного спектра, что обуславливает интерес к теоретическому изучению фононного спектра, плотности колебательных состояний и других решеточных характеристик.

Экспериментальные исследования оптических свойств  $ZnGeP_2$  в решеточной области частот к настоящему времени представлены работами [1-3]. Решеточный вклад в теплоемкость экспериментально изучался в [4].

Кристалл  $ZnGeP_2$  относится к семейству халькопиритов (8 частиц в элементарной ячейке, группа симметрии  $D_{2d}^{12}$ ). Классификация фононного спектра по симметрии проведена в [5]. Теоретическая модель фононных спектров халькопиритов  $A^{IV}B^{IV}C_2^V$  развита в [6-8]. В рамках феноменологической модели жестких ионов [6] межатомное взаимодействие описывается двумя матрицами силовых констант для неэквивалентных связей ближайших соседей. В пренебрежении малыми поправками на тетрагональное сжатие и смещение анионов из идеальных позиций

$$\Phi_{\text{ZnP}} = \begin{pmatrix} \Delta - y + 2z & x - y & x - y + z \\ x - y & \Delta - y & x - y - z \\ x - y + z & x - y - z & \Delta - y + z \end{pmatrix}, \quad \Phi_{\text{GeP}} = \\ = \begin{pmatrix} \Delta + y - 2z & x + y & x + y - z \\ x + y & \Delta + y & x + y + z \\ x + y - z & y + x + z & \Delta + y - z \end{pmatrix}.$$

Четыре параметра короткодействующих сил ( $10^3$  дин/см)  $\Delta = -47.88$ ,  $x = -39.92$ ,  $y = -5.85$ ,  $z = 3.23$  и эффективные заряды ионов (а. е.)  $e_{\text{Zn}}^* = 0.94$ ,  $e_{\text{Ge}}^* = 0.40$ ,  $e_{\text{P}}^* = -0.67$  определены исходя из значений частот, из-

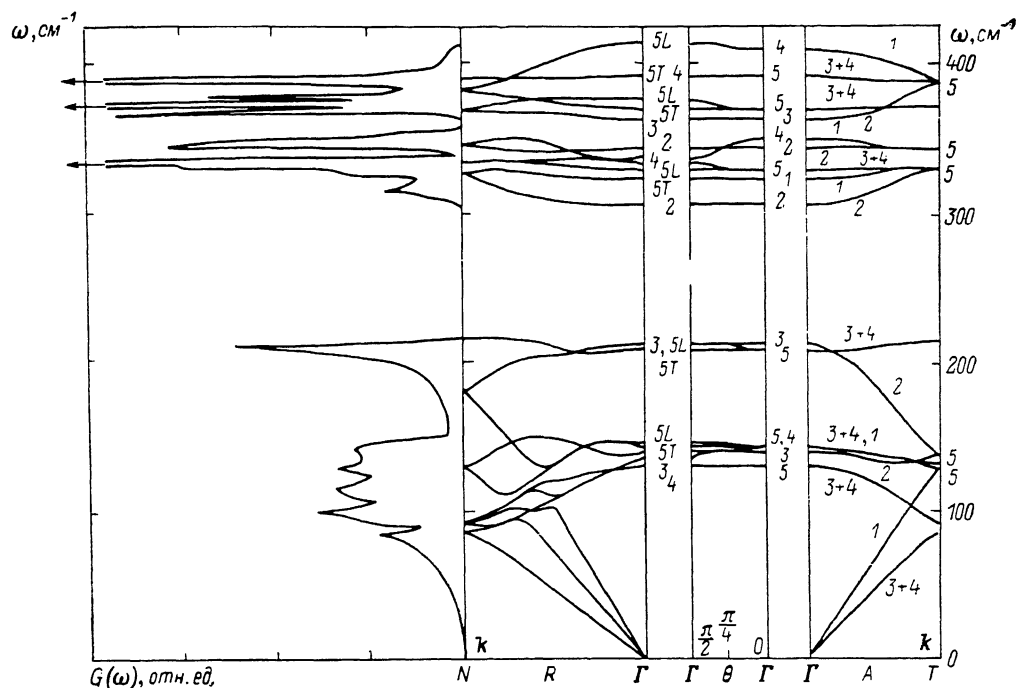


Рис. 1. Фоновый спектр и плотность состояний кристалла  $\text{ZnGeP}_2$ .

меренных в ИК поглощении и КР света [1-3]. Процедура подгонки описана в [6]. О качестве подгонки можно судить по данным таблицы.

Вычисленные и экспериментально измеренные значения частот длинноволновых фононов  $\omega_{LO}/\omega_{TO}$  ( $\text{cm}^{-1}$ ) в  $\text{ZnGeP}_2$

Симметрия фото-на [°]	Эксперимент			Теория
	[1]	[2]	[3]	
$\Gamma_5$	402/385	406/386	405/387	414/391
	375/370	375/369	377/369	375/370
	332/330	—	330/328	334/329
	204/202	203/203	206/204	212/208
	—	141/141	144/143	145/142
$\Gamma_4$	80/80	94/94	—/96	130/130
	401/392	—/396	411/401	411/391
	360/348	—/343	361/341	350/337
$\Gamma_3$	—	—	—	143/138
	—	389	—	364
	—	247	249	211
$\Gamma_1$	—	120	121	141
	—	328	329	324

$$G(\omega) = \sum_{\lambda} \int \delta(\omega - \omega_{\lambda}(\mathbf{k})) d^3k \Omega_a / (2\pi)^3 3s$$

( $\Omega_a$  — объем элементарной ячейки;  $\omega_{\lambda}(\mathbf{k})$  — частота фонона ветви  $\lambda = 1, \dots, 24$ ;  $\mathbf{k}$  — волновой вектор;  $s$  — число частиц в элементарной ячейке) рассчитывалась методом тетраэдров (384 тетраэдра в неприводимой части зоны Бриллюэна, спектр вычислялся в сетке из 125 точек).

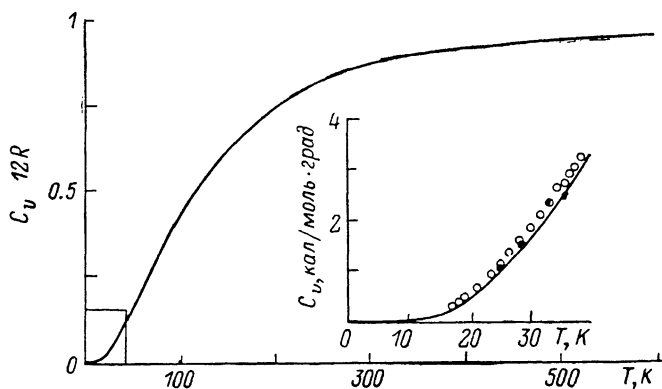


Рис. 2. Удельная теплоемкость  $\text{ZnGeP}_2$ .

Рассчитанный колебательный спектр  $\text{ZnGeP}_2$  в двух симметричных направлениях  $A(00\mu/c)$ ,  $R(\mu/a\mu/a0)$ ,  $\mu \leq \pi$ , а также  $G(\omega)$  приведены на рис. 1. Особенностью фононных спектров халькопиритов является наличие зависимости частот длинноволновых ( $\mathbf{k} \rightarrow 0$ ) фононов от угла  $\theta$  между тетрагональной осью с кристалла и вектором  $\mathbf{k}$ . В центре рис. 1 представлена эта зависимость ( $\Gamma-\Gamma$ ). В нашем расчете  $G(\omega)$  угловая

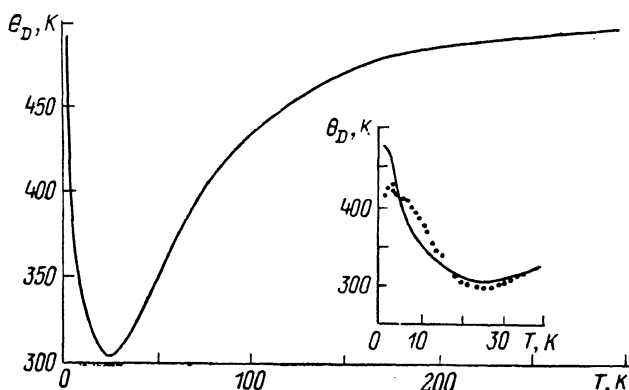


Рис. 3. Температура Дебая  $\text{ZnGeP}_2$ .

дисперсия учитывалась приближенно, в точке  $\Gamma(000)$  в качестве  $\omega_{\lambda}(000)$  принималось значение  $\lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} (\omega_{\lambda}(k00) + \omega_{\lambda}(0k0) + \omega_{\lambda}(00k)) / 3$ . Сходимость метода тетраэдров может характеризоваться степенью выполнения правил сумм  $\int G(\omega) d\omega = 1$ , отклонение от которого в наших расчетах составляет менее 3%. Расчеты  $G(\omega)$  для кристаллов со структурой халькопирита проведены в работах [8, 9] развитым в [9] обобщенным методом спецточек. Наши расчеты  $G(\omega)$  для  $\text{ZnGeP}_2$  в целом согласуются с результатами [8, 9]; различия в основном касаются тонких деталей структуры плотности состояний в высокочастотной области. Заметим, что метод, развитый в [9], обладает плохой сходимостью для акустической части спектра, что не

позволяет правильно воспроизвести дебаевский участок спектра  $G(\omega) \sim \omega^2$ . В методе тетраэдров эта трудность отсутствует.

На рис. 2, 3 приведены удельная теплоемкость  $C_v(T)$  и характеристическая температура  $\Theta_v(T)$  для  $ZnGeP_2$ , рассчитанные без учета поправок на ангармонизм, а также экспериментальные данные [4]. Видно хорошее согласие расчета и эксперимента.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Miller A., Holah G. D., Clark W. C. // J. Phys. Chem. Sol. 1974. V. 35. N 6. P. 685—693.
- [2] Bettini M., Miller A. // Phys. St. Sol. 1974. V. B66. P. 579—586.
- [3] Григорьев В. С., Марков Ю. Ф., Рыбакова Т. Ф. // ФТТ. 1975. Т. 17. № 7. С. 1993—1995.
- [4] Abrahams S. C., Hsu F. S. L. // J. Chem. Phys. 1975. V. 63. N 3. P. 1162—1165.
- [5] Караваев Г. Ф., Поплавной А. С., Тютюрев В. Г. // Изв. вузов, физика. 1970. № 10. С. 42—48.
- [6] Поплавной А. С., Тютюрев В. Г. // ФТТ. 1975. Т. 17. № 3. С. 1055—1060.
- [7] Poplavnoi A. S., Tyuterev V. G. // J. de Physique. 1975. Coll. C. 3. Suppl. N 9. V. 36. P. C3—169—C3—176.
- [8] Поплавной А. С. // Изв. вузов, физика. 1986. № 8. С. 5—18.
- [9] Копытов А. В., Золотарев М. Л., Поплавной А. С. // Деп. в ВИНТИ. 1985. № 209-85.

Томский государственный университет  
ФТИ  
Томск

Поступило в Редакцию  
16 января 1989 г.

УДК 669.863

Физика твердого тела, том 31, в. 8, 1989  
Solid State Physics, vol. 31, № 8, 1989

## МАГНИТОУПРУГИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ ТЕРБИЯ И ДИСПРОЗИЯ

Г. И. Катаев, С. В. Редько,  
М. Р. Самтаров, А. М. Тишин

Интерес к исследованию геликоидальных антиферромагнитных структур (АФМ), наблюдаемых в тяжелых редкоземельных металлах (РЗМ), в настоящее время в значительной степени связан с необходимостью детального изучения воздействия на эти структуры магнитных полей, приложенных вдоль разных кристаллографических направлений. Известно [1], что приложение магнитного поля в базисной плоскости вызывает в Tb и Dy в области существования АФМ структуры магнитный фазовый переход в ферромагнитное состояние (ФМ). Теоретически и экспериментально [2, 3] показана возможность существования в данном случае промежуточного между АФМ и ФМ верного магнитного упорядочения.

В [4-7] обсуждается также возможность существования в окрестности температуры  $\Theta_2$  (точки магнитного фазового перехода парамагнетизм (ПМ)—АФМ) вихревой магнитной структуры. В [4] показано, что равновесное состояние легкоплоскостного ферромагнетика неустойчиво относительно образования вихревой структуры, если ось образца перпендикулярна базисной плоскости. На основании нейтронографических исследований Dy вблизи  $\Theta_2$  в [5] предполагается, что при охлаждении из ПМ в АФМ состояние сначала возникает вихревая структура, существующая в диапазоне 173.7—178.5 К, которая затем при  $T < 173.7$  К переходит в АФМ фазу. Вместе с тем было установлено [5], что при нагреве образца вихревая структура не возникает. Однако поиск вихревой структуры в Dy